

УДК 519.63

**ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ОПИСАНИЯ ЭЛЕКТРОДИФфуЗИОННОГО ПРОЦЕССА И РАЗНОСТНЫЕ МЕТОДЫ ЕЕ РЕАЛИЗАЦИИ<sup>1)</sup>****Н.Г. АБРАШИНА-ЖАДАЕВА, И.А. ТИМОЩЕНКО***Белорусский государственный университет  
E-mail zhadaeva@bsu.by; timoshchenkoia@bsu.by***FRACTIONAL DIFFERENTIAL MODEL OF ELECTRODIFFUSION AND DIFFERENCE METHOD OF ITS REALIZATION****N.G. ABRASHINA-ZHADAIEVA, I.A. TIMOSHCHENKO***Belarusian State University***Аннотация**

В настоящем сообщении для описания электродиффузионного процесса в сложных биологических системах используются уравнения Нернста—Планка—Пуассона с дробной производной по времени. В работе основное внимание уделяется построению численного алгоритма и анализу его реализации. В основу же численной модели положен известный принцип замены дифференциального уравнения разностным. Предлагается неявная конечно-разностная схема, в которой при дискретизации уравнений, содержащих дробную производную по времени значение в текущем узле зависит от всех предыдущих временных слоев. Это увеличивает, с одной стороны, объем вычислений, но с другой – увеличивает диапазон памяти системы. Именно применение таких дискретных моделей играют важную роль при интерпретации эффекта эрeditarности.

**Ключевые слова:** Математическая модель, производная дробного порядка, разностная схема, итерационный метод

**Summary**

In the present communication the equations of Nernst—Planck—Poisson with fractional time derivative are used to describe electrodiffusion process in complex biological systems. The work mainly focuses on the construction of the numerical algorithm and analysis of its implementation. The numerical model is based on the known principle of replacing a differential equations by difference ones. An implicit finite-difference scheme is proposed in which after discretization of equations with fractional time derivative the current value of unknown function depends on all values at previous time layers. On the one hand this increases the volume of computations, but on the other this increases the range of the system memory. It is the use of such discrete models play an important role in the interpretation of the hereditarity.

**Key words:** Mathematical model, fractional derivative, difference scheme, iterative method.

---

**Введение**

В настоящее время для описания процессов аномальной диффузии одним из эффективных и широко используемых аппаратов является интегро-дифференцирование дробного порядка [1–4]. Класс таких интегро-дифференциальных уравнений содержит производные дробного порядка по времени или пространственным переменным. Это связано с тем, что кинетика протекания диффузионных процессов нередко отличается от классической в силу памяти среды или пространственной нелокальности имеет немарковскую стохастическую природу.

---

<sup>1)</sup>Работа выполнена в рамках задания № 3.4.03.2 ГПНИ "Конвергенция"

Диффузия электролитов через гомогенную мембрану обычно описывается системой нелинейных уравнений Нернста–Планка–Пуассона, которые в безразмерном виде записываются следующим образом:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = D_k \frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + D_k Z_k \frac{\partial}{\partial x} \left( C_k \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right), \quad k = 1, 2, \dots, N_s, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) = - \sum_{k=1}^{N_s} Z_k C_k - \rho, \quad (2)$$

где  $N_s$  — число компонентов смеси,  $C_k$ ,  $Z_k$ ,  $D_k$  — соответственно концентрация, валентность, коэффициент диффузии  $k$ -го компонента,  $\varphi$  — потенциал электрического поля,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость среды,  $\rho$  — плотность фиксированного заряда.

В биологических мембранах транспорт ионов осуществляется через ионные каналы, структура которых и характер взаимодействия ионов с мембраной заложены в величинах  $D_k$ ,  $\varepsilon$ ,  $\rho$ . В настоящее время получены экспериментальные свидетельства того, что процесс диффузии в биологических мембранах характеризуется нелинейной зависимостью среднеквадратичного отклонения координаты диффундирующей частицы от времени  $\langle x^2(t) \rangle \sim D_\alpha t^\alpha$ ,  $0 < \alpha < 1$  (см. литературу в [5]). Макроскопический предел такого распределения соотносится с дробной производной по времени типа Герасимова-Капуто [4, 6]

$$\frac{\partial^\alpha f(t)}{\partial t^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{f'(\xi) d\xi}{(t-\xi)^\alpha}. \quad (3)$$

## 1. Постановки задачи

Рассмотрим одномерную задачу диффузии ионов через мембрану толщиной  $\delta_M$ , окруженную слева и справа диффузионными слоями толщиной  $\delta_L$  и  $\delta_R$  соответственно. Начало координат расположим на внешней границе левого диффузионного слоя, а ось  $x$  направим перпендикулярно поверхности мембраны. С учетом изложенного выше модифицируем уравнение (1) следующим образом

$$\xi_k(x) \frac{\partial C_k}{\partial t} + \zeta_k(x) \frac{\partial^\alpha C_k}{\partial t^\alpha} = D_k(x) \frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + D_k(x) Z_k \frac{\partial}{\partial x} \left( C_k \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right), \quad k = 1, 2, \dots, N_s, \quad (4)$$

$$0 < x < \delta_L + \delta_M + \delta_R, \quad t > 0.$$

Такая запись левой части уравнения (4) позволяет учесть тот факт, что аномальная диффузия имеет место только в мембране, тогда как в прилегающих диффузионных слоях протекает обыкновенный процесс диффузии. Более того, таким образом возможно смоделировать различный характер диффузии для различных компонент смеси электролитов.

В качестве граничных условий задачи (2), (4) определяются концентрации электролитов и потенциал на границах диффузионных слоев:

$$C_k(0, t) = C_{Lk}(t), \quad C_k(\delta_L + \delta_M + \delta_R, t) = C_{Rk}(t), \quad k = 1, 2, \dots, N_s, \quad (5)$$

$$\varphi(0, t) = 0, \quad \varphi(\delta_L + \delta_M + \delta_R, t) = -U, \quad (6)$$

и задаются начальные условия

$$C_k(x, 0) = C_k^0(x), \quad k = 1, 2, \dots, N_s. \quad (7)$$

## 2. Аппроксимация и разностная схема

Введем равномерную сетку по времени  $w_\tau = \{t_s = s\tau \in [0, T_f]; s = 0, 1, \dots, S\}$  и сетку с переменным шагом по пространству  $w_h = \{x_j \in [0, \delta_L + \delta_M + \delta_R]; j = 0, 1, \dots, N_L + N_M + N_R\}$ , где  $N_L, N_R, N_M$  — число узлов сетки в левом, правом диффузионных слоях и мембране соответственно. Введем следующие обозначения:  $h_j = x_j - x_{j-1}$ ,  $\bar{h}_i = 0.5(h_i + h_{i+1})$ ,  $C_{ki}^s = C_k(x_i, t_s)$ .

Аппроксимацию присутствующих производных целого порядка проведем стандартным образом [7]. Для аппроксимации дробной производной Капуто воспользуемся следующей аппроксимацией [8]

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} C_k(x, t_{s+1}) = \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{j=0}^s a_j^\alpha (C_k(x, t_{s+1-j}) - C_k(x, t_{s-j})) + \mathcal{O}(\tau^{2-\alpha}),$$

где  $a_j^\alpha = (1+j)^{1-\alpha} - j^{1-\alpha}$ .

В работе [9] для решения задачи (2), (4)–(7) была предложена явная схема и доказана ее устойчивость при достаточно жестких условиях на шаги сетки. Для исключения проблем с устойчивостью применим неявную схему

$$\xi_{ki} \frac{C_{ki}^{s+1} - C_{ki}^s}{\tau} + \zeta_{ki} \frac{C_{ki}^{s+1} - C_{ki}^{\hat{s}}}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)} = \Lambda(D_k) C_{k,i}^{s+1} + Z_k \Lambda(D_k C_k^{s+1}) \varphi_i^{s+1}, \quad (8)$$

$$\Lambda(\varepsilon) \varphi_i^{s+1} = - \sum_{k=1}^{N_s} Z_k C_{ki}^{s+1} - \rho_i, \quad (9)$$

$$C_{k0}^s = C_{L_k}^s, \quad C_{k,NL+NM+NR}^s = C_{R_k}^s, \quad C_{ki}^0 = C_k^0(x_i), \quad (10)$$

$$\varphi_0^s = 0, \quad \varphi_{NL+NM+NR}^s = -U, \quad (11)$$

$$i = 1, 2, \dots, NL + NM + NR - 1, \quad s = 0, 1, \dots, S - 1, \quad k = 1, 2, \dots, N_s.$$

Здесь

$$C^{\hat{s}} = a_s C_0 - \sum_{j=1}^s (a_{s+1-j} - a_{s-j}) C^j,$$

$$\Lambda(b) y_i = \frac{1}{h_i} \left( b_{i+\frac{1}{2}} \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - b_{i-\frac{1}{2}} \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \right).$$

Введем следующие обозначения

$$\mu_{ki} = \frac{\xi_{ki}}{\tau} + \frac{\zeta_{ki}}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)}, \quad C_{ki}^{\tilde{s}} = \frac{1}{\mu_{ki}} \left( \frac{\xi_{ki}}{\tau} C_{ki}^s + \frac{\zeta_{ki}}{\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)} C_{ki}^{\hat{s}} \right),$$

тогда уравнение (8) запишется в виде

$$C_{ki}^{s+1} = C_{ki}^{\tilde{s}} + \frac{1}{\mu_{ki}} \Lambda(D_k) C_{k,i}^{s+1} + \frac{Z_k}{\mu_{ki}} \Lambda(D_k C_k^{s+1}) \varphi_i^{s+1}.$$

### 3. Метод решения сеточных уравнений

Для решения системы нелинейных уравнений (8)–(11) применим следующий итерационный метод. В начале расчетов задаем распределение электрического потенциала в виде  $-Ux/(\delta_L + \delta_M + \delta_R)$  или его можно найти по явной схеме, изложенной в [9].

1. На  $m$ -том шаге итераций рассчитываются величины  $C_{ki}^{s+1,m+1}$ ,  $\varphi_i^{s+1,m+1}$ . В качестве нулевого приближения для потенциала на  $s+1$  временном слое возьмем потенциал на предыдущем слое, то есть  $\varphi^{s+1,0} = \varphi^s$ .

2. Найдем промежуточную концентрацию  $C^{*,m}$ :

$$C_{ki}^{*,m} = C_{ki}^{\tilde{s}} + \frac{1}{\mu_i} \Lambda(D_k) C_{k,i}^{*,m} + \frac{Z_k}{\mu_i} \Lambda(D_k C_k^{*,m}) \varphi_i^{s+1,m}. \quad (12)$$

3. Скорректируем потенциал и вычислим новое значение концентрации:

$$\begin{aligned} \varphi^{s+1,m+1} &= \varphi^{s+1,m} + \Delta \varphi^{s+1,m}, \\ C_{ki}^{s+1,m+1} &= C_{ki}^{*,m} + \frac{Z_k}{\mu_i} \Lambda(D_k C_k^{*,m}) \Delta \varphi_i^{s+1,m}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\Lambda(\varepsilon)\Delta\varphi_i^{s+1,m} = -\sum_{k=1}^{N_s} Z_k C_{ki}^{s+1,m+1} - \rho_i - \Lambda(\varepsilon)\varphi_i^{s+1,m}. \quad (14)$$

Для этого подставим уравнение (13) в (14), после чего найдем  $\Delta\varphi^{s+1,m}$ , затем явным образом вычислим  $C_{ki}^{s+1,m+1}$  из уравнения (13).

4. Условие окончания итераций:

$$\max_{k,i} |C_{ki}^{s+1,m+1} - C_{ki}^{s+1,m}| < \omega,$$

где  $\omega$  — наперед заданная погрешность.

Приведем системы алгебраических уравнений для промежуточной концентрации  $C_{ki}^{*,m}$  и коррекции потенциала  $\Delta\varphi_i^{s+1,m}$  в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i C_{ki-1}^{*,m} - \hat{c}_i C_{ki}^{*,m} + \hat{b}_i C_{ki+1}^{*,m} &= -\hat{f}_i, \\ \hat{a}_i &= \frac{D_{ki-1/2}}{\mu_i \hbar_i h_i} \left[ 1 - Z_k \frac{\varphi_i^{s+1,m} - \varphi_{i-1}^{s+1,m}}{2} \right], \quad \hat{b}_i = \frac{D_{ki+1/2}}{\mu_i \hbar_i h_{i+1}} \left[ 1 + Z_k \frac{\varphi_{i+1}^{s+1,m} - \varphi_i^{s+1,m}}{2} \right], \\ \hat{c}_i &= 1 + \frac{D_{ki-1/2}}{\mu_i \hbar_i h_i} \left[ 1 + Z_k \frac{\varphi_i^{s+1,m} - \varphi_{i-1}^{s+1,m}}{2} \right] + \frac{D_{ki+1/2}}{\mu_i \hbar_i h_{i+1}} \left[ 1 - Z_k \frac{\varphi_{i+1}^{s+1,m} - \varphi_i^{s+1,m}}{2} \right], \\ \hat{f}_i &= C_{ki}^{\tilde{s}}; \\ \check{a}_i \Delta\varphi_{i-1}^{s+1,m} - \check{c}_i \Delta\varphi_i^{s+1,m} + \check{b}_i \Delta\varphi_{i+1}^{s+1,m} &= -\check{f}_i, \\ \check{a}_i &= \frac{1}{h_i \hbar_i} \left[ \varepsilon_{i-1/2} + \frac{1}{\mu_i} \chi_{i-1/2} \right], \quad \check{b}_i = \frac{1}{h_{i+1} \hbar_i} \left[ \varepsilon_{i+1/2} + \frac{1}{\mu_i} \chi_{i+1/2} \right], \quad \check{c}_i = \check{a}_i + \check{b}_i, \\ \chi_{j+1/2}^m &= \sum_{k=1}^{N_s} Z_k^2 D_{ki+1/2} C_{ki+1/2}^{*,m}, \\ \check{f}_i &= \sum_{k=1}^{N_s} Z_k C_{ki}^{*,m} + Q_{fix_i} + \frac{1}{h_i} \left( \varepsilon_{i+1/2} \frac{\varphi_{i+1}^{s+1,m} - \varphi_i^{s+1,m}}{h_{i+1}} - \varepsilon_{i-1/2} \frac{\varphi_i^{s+1,m} - \varphi_{i-1}^{s+1,m}}{h_i} \right). \end{aligned}$$

Впервые подобный алгоритм был предложен для классической системы уравнений Нернста—Планка—Пуассона в работе [10]. В следующей части настоящего сообщения представлены некоторые расчеты и графические сопоставления алгоритмов [10] и предложенных в данной работе.

#### 4. Вычислительный эксперимент

Для верификации описанного алгоритма рассматривается задача (2), (4)–(7), где функции  $D_k(x)$ ,  $\rho(x)$ ,  $\xi_k(x)$ ,  $\zeta_k(x)$  являются кусочно непрерывными, принимающими следующие постоянные значения в мембране и диффузионных слоях:

Функция	$0 \leq x < \delta_L$	$\delta_L \leq x \leq \delta_L + \delta_M$	$\delta_L + \delta_M < x \leq \delta_L + \delta_M + \delta_R$
$D_k(x)$	$D_{L_k}$	$D_{M_k}$	$D_{R_k}$
$\rho(x)$	0	-1	0
$\xi_k(x)$	1	0	1
$\zeta_k(x)$	0	1	0

и в случае трехкомпонентной смеси электролитов  $D_{L_1} = D_{M_1} = D_{R_1} = 1$ ,  $D_{L_2} = D_{R_1} = 2$ ,  $D_{M_2} = 1$ ,  $D_{L_3} = D_{M_3} = D_{R_3} = 1$ ,  $C_{L_1} = C_{R_1} = 1$ ,  $C_{L_2} = C_{R_2} = 0.5$ ,  $C_{L_3} = C_{R_3} = 0.25$ ,  $Z_1 = 1$ ,  $Z_2 = -1$ ,  $Z_3 = -2$ ,  $U = -50$ .

Дискретную сетку построим следующим образом: полагаем шаг сетки на границе мембраны и диффузионного слоя равным  $\Delta$ , и левом и правом диффузионном слое в направлении от мембраны шаг сетки

возрастает в геометрической прогрессии с знаменателями  $q_L$  и  $q_R$  соответственно, в левой половине мембраны шаг возрастает в геометрической прогрессии с знаменателем  $q_M$ , а в правой — убывает с знаменателем  $1/q_M$ . В приведенных в настоящей работе численных экспериментах использованы следующие значения параметров:  $\delta_L = \delta_M = \delta_R = 1$ ,  $\Delta = 10^{-3}$ ,  $q_L = q_R = 1.037$ ,  $N_L = N_R = 100$ ,  $q_M = 1.076$ ,  $N_M = 100$ ,  $\varepsilon(x) = 10^{-4}$ .

На рис. 1 представлена пространственное распределение концентраций электролитов в различные моменты времени. Расчеты проводились для различных значений порядка дробной производной  $\alpha$  в пределах от 0.2 до 1 с интервалом 0.2. Стрелкой на рисунке указано направление возрастания  $\alpha$ . Распределение концентраций при  $\alpha = 1$  соответствует результатам работы [10].

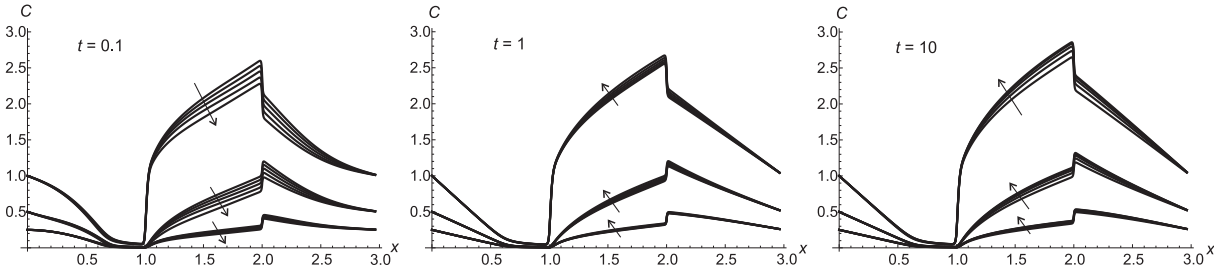


Рис. 1: Пространственное распределение концентраций электролитов

Поведение решения типично для дробной диффузии: на начальных этапах процесс идет быстрее чем при обычной диффузии, а затем замедляется тем больше, чем меньше значение порядка дробной производной. Характерно, что число итераций уменьшается с возрастанием номера временного слоя  $s$ , причем оно сильно зависит от значений  $\alpha$  (см. рис. 2).

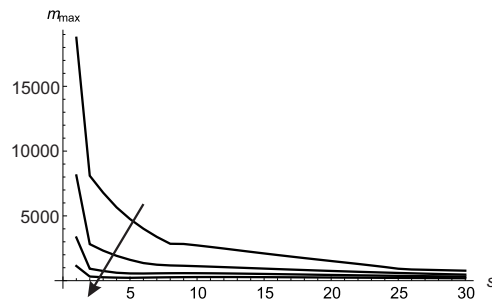


Рис. 2: Число итераций в зависимости от номера временного слоя при различных значениях  $\alpha$ : 0.2, 0.4, 0.6, 0.8,  $\omega = 10^{-6}$ . Направление возрастания  $\alpha$  указано стрелкой.

Интересный результат дает сравнение расчетов, приведенных на рис. 1, и расчетов в случае  $\xi_k(x) = 0$ ,  $\zeta_k(x) = 1$ ,  $x \in [0, \delta_L + \delta_M + \delta_R]$ , т.е. когда аномальная диффузия предполагается и в мембране и в прилегающих диффузионных слоях. Как видно из рис. 3 различие наблюдается только в начальные моменты времени, тогда как при больших временах системы приходят к одинаковому состоянию.

## 5. Заключение.

В настоящей работе представлена реализация неявной разностной задачи для обобщенной системы уравнений Нернста–Планка–Пуассона, учитывающей аномальные процессы диффузии. Для апробации

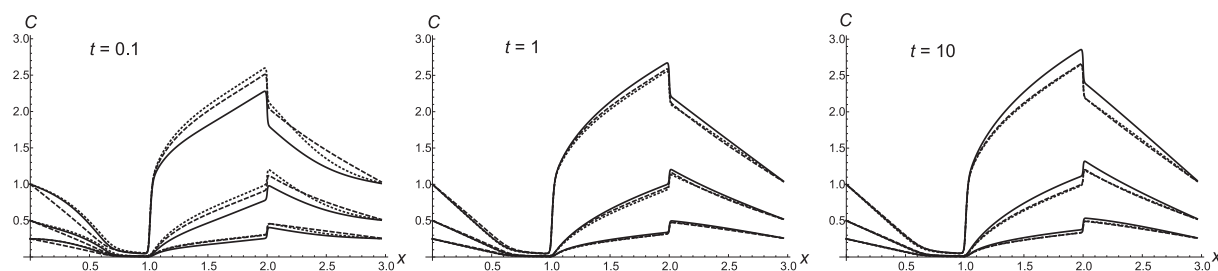


Рис. 3: Сравнений пространственное распределение концентраций электролитов для случая обыкновенной диффузии (сплошная линия), аномальной диффузии только в мембране (пунктирная линия) и во всей рассматриваемой области (штриховая линия) при  $\alpha = 0.2$ .

алгоритма проведены численные расчеты и выявлено, что алгоритм обеспечивает надежную работу предложенной схемы. Кроме того, вычислительный эксперимент показал, что обобщенная система уравнений Нернста—Планка—Пуассона сохраняет все характерные свойства решений своего “прородителя”.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Тарасов В.Е.** Модели теоретической физики с интегро-дифференцированием дробного порядка. — Москва—Ижевск: РХД, 2011. — 567 с.
2. **Учайкин В.В.** Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы // УФН. — 2003. — Т. 173(8). — С. 847–876.
3. **Podlubny I.** Fractional Differential equations. — New York: Academic Press, 1999. — 366 p.
4. **Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И.** Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их применения. — Минск: Наука и техника, 1987. — 687 с.
5. **Langlands T.A.M., Henry B.I., Wearne S.L.** Fractional cable equation models for anomalous electrodiffusion in nerve cells: infinite domain solutions // J. Math. Biol. — 2009. — V. 59. — P. 761–808.
6. **Gorenflo R. et. al.** Discrete random walk models for space-time fractional diffusion // Chem. Phys. — 2002. — V. 284. — P. 521–541
7. **Самарский А.А.** Введение в теорию разностных схем. — М.: Наука, 1971. — 552 с.
8. **Шхануков-Лафишев М.Х., Таукенова Ф.И.** Разностные методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений дробного порядка // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2006. — Т. 46, № 10. — С. 1871–1881.
9. **Абрашина-Жадаева Н.Г., Тимощенко И.А.** Математическая модель электродиффузионного процесса на основе дифференциальных уравнений дробных порядков // Материалы Девятой Всероссийской конференции «Сеточные методы для краевых задач и приложения». — Казань: Отечество, 2012. — С. 8–14.
10. **Volgin V.M., Davydov A.D.** Ionic transport through ion-exchange and bipolar membranes // Journal of Membrane Science — 2005. — V. 259. — P. 110–121

## REFERENCES

1. **Tarasov V.E.** Fractional Dynamics: Applications of Fractional Calculus to Dynamics of Particles, Fields and Media. — Springer, 2011. — 505 p.

2. **Uchaikin V.V.** Self-similar anomalous diffusion and Levi-stable laws // *Phys. Usp.* — 2003. — V. 46. — P. 821–849.
3. **Podlubny I.** Fractional Differential equations. — New York: Academic Press, 1999. — 366 p.
4. **Samko S., Kilbas A., Marichev O.** Fractional integrals and derivatives. — New York: Gordon and Breach, 1993. — 1006 p.
5. **Langlands T.A.M., Henry B.I., Wearne S.L.** Fractional cable equation models for anomalous electrodiffusion in nerve cells: infinite domain solutions // *J. Math. Biol.* — 2009. — V. 59. — P. 761–808.
6. **Gorenflo R. et. al.** Discrete random walk models for space-time fractional diffusion // *Chem. Phys.* — 2002. — V. 284. — P. 521–541
7. **Samarskii A.A.** The theory of difference schemes. — New York: Marcel Dekker, 2001. — 760 p.
8. **Taukenova F.I., Shkhanukov-Laifishev M.Kh.** Difference methods for solving boundary value problems for fractional differential equations // *Computational Mathematics and Mathematical Physics.* — 2006. — V. 46, № 10. — P. 1785–1795.
9. **Abrashina-Zhadaeva N.G., Timoshchenko I.A.** Mathematical model of electrodiffusion based on fractional differential equations [Matematicheskaya model elektrodifuzionnogo transporta na osnove differentsialnykh uravneniy drobnnykh poryadkov] // *Materialy IX Vserossiyskoy konferencii «Setochnye metody dlya kraevykh zadach i prilozheniya».* — Kazan: Otechestvoi, 2012. — P. 8–14 (In Russian).
10. **Volgin V.M., Davydov A.D.** Ionic transport through ion-exchange and bipolar membranes // *Journal of Membrane Science* — 2005. — V. 259. — P. 110–121